

Моделирование механических и пьезоэлектрических свойств гидроксипатита, модифицированного Sr/Ca замещениями

В.С. Быстров¹, Е.В. Парамонова¹, А.В. Быстрова^{1,2}, Л.А. Авакян³, Н.В. Булина⁴

¹Институт математических проблем биологии РАН — филиал ФИЦ Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 142290 Пущино, Россия
e-mail: vsbys@mail.ru

²Рижский технический университет, LV-1658 Рига, Латвия

³Физический факультет, Южный Федеральный университет, 344090 Ростов-на-Дону, Россия

⁴Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, 630128 Новосибирск, Россия

Гидроксипатит (ГАП) широко используется в качестве биосовместимых материалов для различных медицинских применений. Известно, что некоторые замещения в подрешетках катионов и анионов ГАП могут улучшать механические свойства ГАП. С этой целью проводятся работы по исследованию таких замещений для улучшения свойств ГАП, в частности, за счет замещения ионов кальция ионами стронция [1].

В работе рассмотрены и проанализированы структурные и физические свойства Sr-замещенного ГАП – с замещением атомом кальция на стронций (Sr/Ca). Моделирование и расчеты свойств такого модифицированного ГАП, изменяющихся при замещении Sr/Ca, проводится методами теории функционала плотности (DFT) в различных приближениях [2-4]. Расчет данных структурных изменений (постоянных решетки и объема ячейки) при замещении Sr/Ca в ГАП и их сравнение с экспериментальными данными [1] показали, что здесь есть аналогичные изменения - увеличение этих параметров после замещения Sr/Ca. Изучены также изменения механических и упругих свойств [5]: рассчитаны значения объемного модуля и ряда упругих характеристик, до и после замещения Sr/Ca, эти данные также были проанализированы на предмет их соответствия наблюдаемым данным.

Известно, что упорядоченные гексагональные и моноклинные фазы ГАП имеют собственную поляризацию, а неупорядоченные – нет [4-6]. Эти их сегнетоэлектрические свойства вызывают пьезоэлектрические эффекты. Исследование пьезоэлектрических свойств ГАП проводится DFT методами в комбинации с квантовыми полуэмпирическими методами расчета (AM1, PM3) из программного пакета HyperChem [5]; также исследуется изменение пьезоэлектрических коэффициентов ГАП при замещениях Sr/Ca. Полученные результаты анализируются в сравнении с данными [4-6]. Кроме того, установлено также изменения ширины запрещенной зоны E_g и работы выхода $\Delta\phi$, после замещения Sr/Ca. В ряде экспериментов было показано, что увеличение $\Delta\phi$ приводит к увеличению адгезии костных клеток [7]. Более того, было также показано, легирование ГАП атомами Sr также увеличивает адгезию костных клеток к поверхности ГАП [8]. Полученные результаты моделирования указывают на важность замещения Sr/Ca в ГАП для изменения его механических, пьезоэлектрических свойств и его биосовместимости.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда (РНФ) № 21-12-00251.

1. N.V. Bulina, M.V. Chaikina, I.Yu. Prosanov, *Inorg. Mater.* **54**(8), 820 (2018).
2. V.S. Bystrov, J. Coutinho, A.V. Bystrova, et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48**, 195302 (2015).
3. L.A. Avakyan, E.V. Paramonova, J. Coutinho, et al., *J. Chem. Phys.* **148**, 154706 (2018).
4. V.S. Bystrov, J. Coutinho, L.A. Avakyan, et al., *Ferroelectrics* **559**, 45 (2020).
5. V.S. Bystrov, *Ferroelectrics* **475**, 148 (2015).
6. V.S. Bystrov, *Ferroelectrics* **541**, 25 (2019).
7. Yu. Dekhtyar, V. Bystrov, A. Bystrova, et al., *IFMBE Proceedings* **38**, 182 (2013).
8. C. Capuccini, P. Torricelli, E. Boanini, et al., *J. Biomed. Mater. Res., Part A* **89**, 594 (2009).